

PATENT ABSTRACTS OF JAPAN

(11)Publication number : 10-283344

(43)Date of publication of application : 23.10.1998

(51)Int.Cl. G06F 17/18
G06F 17/00

(21)Application number : 09-082723

(71)Applicant : RIKAGAKU
KENKYUSHO
UMENO TAKESHI

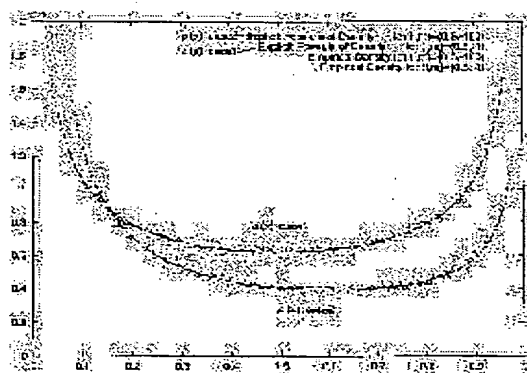
(22)Date of filing : 01.04.1997 (72)Inventor : UMEMO TAKESHI

(54) STATISTICAL SIMULATION METHOD AND STORAGE MEDIUM RECORDED WITH THE PROGRAM

(57)Abstract:

PROBLEM TO BE SOLVED: To shorten the converging time of calculated results, and to handle a project which can not be handled in a conventional way by operating statistical simulation similar to a Monte Carlo method, and increasing a calculating speed and a calculation error rather than the Monte Carlo method.

SOLUTION: A random number having a nonuniform density function $\gamma_0(x)$ is generated with a chaos ideal model $x_{n+1}=F(x_n)$, and the simulation of a probability phenomenon is operated by applying a Monte Carlo method. The chaos ideal model $F(x)$ is the class of mapping introduced from the addition theorem of an elliptic function, and the nonuniform density function $p(x)$ is expressed with the central function of a variable (x) . A generalized urnium = Neumann mapping and generalized Cubic mapping is obtained as the definite example of the chaos ideal model $F(x)$, and the uniform density function (x) is expressed with an expression $(\mu(dx))$ indicates fixed measure in the expression).



$$\mu(dx) = \frac{1}{2k(0.5)} \sqrt{\frac{1}{x(1-x)(1-x^2)}} dx$$

LEGAL STATUS

[Date of request for examination] 15.06.1999

[Date of sending the examiner's
decision of rejection]

[Kind of final disposal of application
other than the examiner's decision
of rejection or application
converted registration]

[Date of final disposal for
application]

[Patent number] 3357263

[Date of registration] 04.10.2002

[Number of appeal against
examiner's decision of rejection]

[Date of requesting appeal against
examiner's decision of rejection]

[Date of extinction of right]

Copyright (C); 1998,2003 Japan Patent Office

(19) 日本国特許庁 (J P)

(12) 公開特許公報 (A)

(11) 特許出願公開番号

特開平10-283344

(43) 公開日 平成10年(1998)10月23日

(51) Int.Cl.⁸

識別記号

F I

G 0 6 F 17/18
17/00

G 0 6 F 15/36
15/20

Z
D

審査請求 未請求 請求項の数 5 O L (全 8 頁)

(21) 出願番号 特願平9-82723

(22) 出願日 平成9年(1997)4月1日

特許法第30条第1項適用申請有り 1996年12月発行のR
I K E N Review No. 14に文書をもって発表

(71) 出願人 000006792

理化学研究所
埼玉県和光市広沢2番1号

(71) 出願人 597044841

梅野 健
東京都板橋区成増1丁目16番地18号 R S
Kビル206号室

(72) 発明者 梅野 健

埼玉県和光市広沢2番1号 理化学研究所
内

(74) 代理人 弁理士 堀田 実 (外1名)

(54) 【発明の名称】 統計的シミュレーション方法及びこのプログラムを記録した記憶媒体

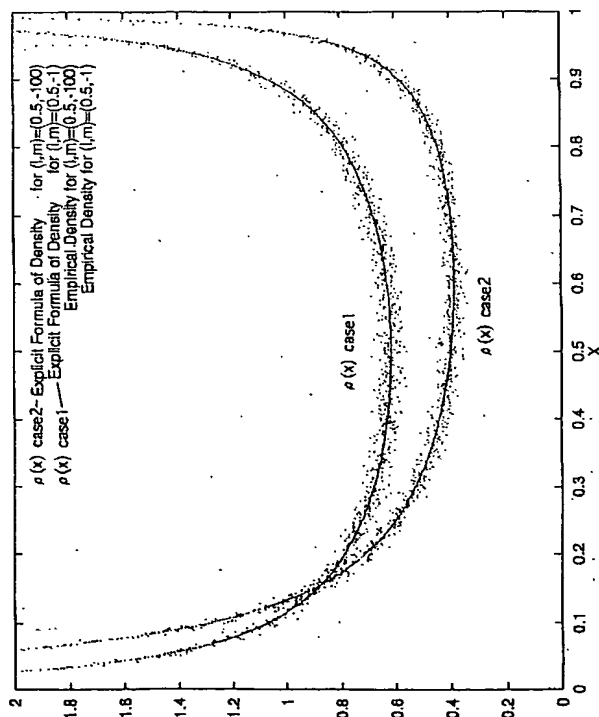
(57) 【要約】

【課題】 モンテカルロ法と同様の統計的シミュレーションを行うことができ、かつ、モンテカルロ法よりも計算速度と計算誤差を高めることができ、これにより、計算結果の収束時間を短縮し、従来取り扱えなかった課題の取扱いを可能にすることができる統計的シミュレーション方法及びこのプログラムを記録した記憶媒体を提供する。

【解決手段】 非一様な密度関数 $\rho(x)$ をもつ乱数を、カオスの理想モデル $x_{n+1} = F(x_n)$ で発生させて、モンテカルロ法を適用して確率現象をシミュレーションする。カオスの理想モデル $F(x)$ は、楕円関数の加法定理から導かれる写像のクラスであり、非一様な密度関数 $\rho(x)$ は、変数 x の代数関数で表される。カオスの理想モデル $F(x)$ の具体例として、一般化ウラム=ノイマン写像、一般化 Cubic 写像があり、それらの非一様な密度関数 $\rho(x)$ は【数1】で表される。

【数1】

$$\rho(x) = \frac{1}{2K(1-m) \sqrt{x(1-x)(1-bx)(1-mx)}}$$



【特許請求の範囲】

【請求項1】 物理量の期待値や多体問題を計算するにあたり、乱数を発生させて確率現象を構成し、前記計算を統計的に行う統計的シミュレーション方法において、非一様な密度関数 $\rho(x)$ をもつ乱数を、カオスを生成する力学系 $x_{n+1} = F(x_n)$ で発生させる、ことを特徴とする統計的シミュレーション方法。

【請求項2】 前記非一様な密度関数 $\rho(x)$ は、 $x=0$ 及び 1 で無限大となり、 $0 < x < 1$ の範囲で下に凸な連続曲線である、ことを特徴とする請求項1に記載の統計的シミュレーション方法。

【請求項3】 前記カオスのモデル $F(x)$ は、一般化ウラム＝ノイマン写像又は一般化 Cubic 写像で代表される、楕円関数の加法定理より導かれる有理関数によって表され、非一様な密度関数 $\rho(x)$ は、一般化ウラム＝ノイマン写像、一般化 Cubic 写像の場合【数1】で表される

【数1】

$$\mu(dx) = \rho(x)dx$$

$$\rho(x) = \frac{1}{2K(l, m) \sqrt{x(1-x)(1-lx)(1-mx)}}$$

ことを特徴とする、請求項1に記載の統計的シミュレーション方法。

【請求項4】 前記カオスモデル $F(x)$ により発生される非一様乱数列を、長い周期を持った一様乱数列に変換して前記計算を行う、ことを特徴とする請求項1に記載の統計的シミュレーション方法。

【請求項5】 物理量の期待値や多体問題を計算するにあたり、非一様な密度関数 $\rho(x)$ をもつ乱数を、カオスモデル $F(x)$ で発生させて確率現象を構成し、前記計算を統計的に行う統計的シミュレーションプログラムを記憶した記憶媒体。

【発明の詳細な説明】

【0001】

【発明の属する技術分野】本発明は、物理量の期待値等を統計的に計算する統計的シミュレーション方法及びこのプログラムを記録した記憶媒体に関する。

【0002】

【従来の技術】物理量の期待値等を統計的に計算する統計的シミュレーション方法として、よく知られている方法にモンテカルロ法がある。このモンテカルロ法は、例えばデバイスモデリングの分野で従来から広く用いられており、この方法を用いて開発された素子として、TED、MOSFET、MESFET、バイポーラ・トランジスタ、ヘテロ構造素子、ショットキー・ダイオード、光検出器、等が知られている。また、pn接合、ヘテロ接合素子等のシミュレーションや、不確定なものが沢山集まったその他の多体問題、例えば、オペレーションリサーチや社会学の分野でもモンテカルロ法が用いられて

いる。

【0003】上述したモンテカルロ法は、乱数を発生させて確率現象を構成し、その確率現象を計算機を用いて計算又はシミュレーションする方法である。このモンテカルロ法を多数粒子シミュレーションに応用した場合について考えると、この方法は、ある粒子（電子や分子）の運動を十分長い時間に渡って追跡すれば、全電子系や全ガス系の挙動に関する情報が得られることを前提としている。そして、ある粒子（キャリア）の自由走行過程において、その自由走行を決定する条件に固有の確率分布関数を使用して乱数を連続的に発生させ、そのキャリアの時間経過を計測することにより粒子の動きをシミュレーションしている。

【0004】これを一般化すると、モンテカルロ法は、「集団平均は長時間平均に等しい」というエルゴート仮説を基礎としたものである。すなわち、乱数を発生させる決定論的方程式 $x_{n+1} = F(x_n)$... (式1) のエルゴート性をうまく利用したものである。ここで (式1) がエルゴート性を持つとは、(式1) に従う物理量 x_n ($\in M$) に対し、不変測度 $\mu(dx)$ が存在し、【数2】が成立することをいう。【数2】は、相空間M上の不変測度 $\mu(dx)$ に関する関数 $Q(x)$ の積分が、 $Q(x_i)$ の時間積分に等しいことを意味し、上述した前提を数式で表したものである。【数2】によれば、モンテカルロ法は、【数2】の右辺の相空間M上の空間積分を、(式1) の不変測度 $\mu(dx)$ を構成する確率現象としてとらえ、計算の易しい時間積分に置換して計算するものである。

【0005】

【数2】

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N Q(x_i) = \int_M Q(x) \mu(dx)$$

【0006】

【発明が解決しようとする課題】上述したように、モンテカルロ法は、計算機を用いて物理量の期待値等を統計的にシミュレーションする方法であり、広い分野で利用されてきたが、モンテカルロ法を適用するには、大型の計算機が自由に使用できる環境が必要であり、また現在の計算機的能力では取り扱えない場合もある。すなわち、従来のモンテカルロ法では、一様な不変測度 $\mu(dx)$ をもつ乱数を1ステップ毎に発生させなければならず、その一様乱数は、「有限の周期を持つ擬似乱数」であるため計算速度や計算誤差をある程度以上には高めることができない問題点があった。このため、計算結果の収束までの時間が短縮できず、大型の計算機を長時間使用しても、取り扱えない場合が多い問題点があった。

【0007】本発明は、かかる問題点を解決するために創案されたものである。すなわち、本発明の目的は、モンテカルロ法と同様の統計的シミュレーションを行うこ

とができ、かつ、モンテカルロ法よりも計算速度と計算誤差を高めることができ、これにより、計算結果の収束時間を短縮し、従来取り扱えなかった課題の取扱いを可能にすることができる統計的シミュレーション方法及びこのプログラムを記録した記憶媒体を提供することにある。

【0008】

【課題を解決するための手段】本発明によれば、物理量の期待値や多体問題を計算するにあたり、乱数を発生させて確率現象を構成し、前記計算を統計的に行う統計的シミュレーション方法において、非一様な密度関数 $\rho(x)$ をもつ乱数を、カオスを生成する力学系 $x_{n+1} = F(x_n)$ で発生させることを特徴とする統計的シミュレーション方法が提供される。

【0009】本発明の好ましい実施形態によれば、前記非一様な密度関数 $\rho(x)$ は、 $x=0$ 及び 1 で無限大となり、 $0 < x < 1$ の範囲で下に凸な連続曲線である。また、前記カオスの理想モデル $F(x)$ は、一般化ウラム＝ノイマン写像又は一般化 Cubic 写像で代表される、楕円関数の加法定理より導かれる有理関数によって表され、非一様な密度関数 $\rho(x)$ は、一般化ウラム＝ノイマン写像、一般化 Cubic 写像の場合【数3】で表される。

【0010】さらに、前記カオスの理想モデル $F(x)$ により発生される非一様な密度関数を持つ乱数列を、長い周期を持った一様乱数列に変換して通常のモンテカルロ計算を行うこともできる。

【0011】

【数3】

$$\mu(dx) = \rho(x)dx$$

$$\rho(x) = \frac{1}{2K(l, m) \sqrt{x(1-x)(1-lx)(1-mx)}}$$

【0012】上記本発明の方法によれば、密度関数 $\rho(x)$ を持つ乱数を、カオスの写像 $F(x)$ を用いて連続的に発生させるので（すなわち、カオスの性質からある点 x の軌道を考えれば、その軌道はランダムなものとなる）、決定論的方程式（式1）により1ステップ毎に乱数を発生させなければならないモンテカルロ法よりも計算速度自体が速くなる。また、本発明の方法では、カオスの理想モデル $F(x)$ を用いた結果、密度関数 $\rho(x)$ が非一様となり、一様な密度関数を持つ算術乱数を生成し確率現象をシミュレーションするモンテカルロ法と比べて、実際の適用の結果、後述するように計算誤差が小さくなり、収束が速くなることがわかった。その他の手法は、モンテカルロ法と同様に行うので、モンテカルロ法と同様の統計的シミュレーションを行うことができる。更に、カオスの理想モデル $F(x)$ により発生される非一様乱数列を一様乱数列に変換することにより、従来のモンテカルロ法と全く同様に適用することも

できる。

【0013】従って、計算結果の収束時間を短縮し、従来取り扱えなかった課題の取扱いを可能にすることができる。

【0014】更に、本発明によれば、物理量の期待値や多体問題を計算するにあたり、非一様な密度関数 $\rho(x)$ をもつ乱数を、カオスの理想モデル $F(x)$ で発生させて確率現象を構成し、前記計算を統計的に行う統計的シミュレーションプログラムを記憶した記憶媒体が提供される。かかる記憶媒体の利用により、本発明の適用を迅速に誤りなく実施することができる。

【0015】

【発明の実施の形態】以下、本発明の好ましい実施形態を図面を参照して説明する。なお、各図において共通する部分には同一の符号を付して重複した説明を省略する。まず、一様乱数を使うモンテカルロ法と比較して本発明を説明する。モンテカルロ法とは、計算機を用いて確率現象をシミュレーションする方法である。その意味では、本発明の方法もモンテカルロ法の範疇に入るものである。ただし、従来のモンテカルロ法は全て最初に一様な密度関数を持つ算術乱数を生成して確率現象をシミュレーションするのに対し、本発明の方法は最初に非一様な密度関数 $\rho(x)$ をもつ乱数を自然界に普遍的に見られるカオスの理想モデル $F(x)$ で発生している点が大きく異なっている。

【0016】ここで、カオスの理想モデル $F(x)$ の例は、【数4】で表され、その例の場合の非一様な密度関数 $\rho(x)$ は、【数5】で表される。ここで、【数4】の case 1 は、一般化ウラム＝ノイマン写像（図1の(A) (B)）であり、case 2 は、一般化 Cubic 写像（図1の(C) (D)）であり、これらの写像は全て楕円関数の加法定理から導かれる有理写像であることを特徴とする。

【0017】

【数4】

case1:

$$F(x) = \frac{4x(1-x)(1-lx)(1-mx)}{1+Ax^2+Bx^3+Cx^4}$$

case2:

$$F(x) = \frac{x(-3+4x+\sum_{i=1}^4 A_i^{(3)} x^i)^2}{1+\sum_{i=2}^9 B_i^{(3)} x^i}$$

【0018】

【数5】

$$\mu(dx) = \rho(x)dx$$

$$\rho(x) = \frac{1}{2K(l, m) \sqrt{x(1-x)(1-lx)(1-mx)}}$$

【0019】なお、【数4】において、A, B, C, A

$$A = -2(l+m+lm)$$

$$B = 8lm$$

$$C = l^2 + m^2 - 2lm - 2l^2m - 2lm^2 + l^2m^2$$

$$-\infty < m \leq l < 1$$

$$A_1^{(3)} = 4(l+m),$$

$$A_2^{(3)} = -6(l+m+lm),$$

$$A_3^{(3)} = 12lm,$$

$$A_4^{(3)} = l^2 + m^2 - 2lm - 2l^2m - 2lm^2 + l^2m^2,$$

$$B_2^{(3)} = -12(l+m+lm),$$

$$B_3^{(3)} = 8(l+m+l^2+m^2+l^2m+lm^2+15lm),$$

$$B_4^{(3)} = 6(5l^2+5m^2-26lm-26l^2m-26lm^2+5l^2m^2),$$

$$B_5^{(3)} = 24(-2l^2-2m^2-2l^3-2m^3+4lm+7l^2m+7lm^2)$$

$$+24(4l^3m+4lm^3+7l^2m^2-2l^3m^2-2l^2m^3),$$

$$B_6^{(3)} = 4(4l^2+4m^2+4l^4+4m^4+17l^3+17m^3-8lm)$$

$$+4(-17l^2m-17lm^2-17l^3m-17lm^3-8l^4m-8lm^4)$$

$$+4(4l^2m^4+4l^4m^2-17l^3m^2-17l^2m^3+17l^3m^3-54l^2m^2),$$

$$B_7^{(3)} = 24(-l^3-m^3-l^4-m^4+l^2m+lm^2-l^3m-lm^3)$$

$$+24(l^4m+lm^4+4l^2m^2+4l^3m^2+4l^2m^3)$$

$$+24(l^4m^2+l^2m^4-l^3m^3-l^4m^3-l^3m^4),$$

$$B_8^{(3)} = 3(3l^4+3m^4+4l^3m+4lm^3+4l^4m+4lm^4-14l^2m^2)$$

$$+3(-4l^3m^2-4l^2m^3-4l^3m^3-14l^4m^2-14l^2m^4+4l^4m^3+4l^3m^4+3l^4m^4),$$

$$B_9^{(3)} = 8(-l^4m-lm^4+l^3m^2+l^2m^3+l^4m^2+l^2m^4-2l^3m^3+l^4m^3+l^3m^4-l^4m^4)$$

【0021】

【数7】

$$K(l, m) = \int_0^1 \frac{du}{\sqrt{(1-u^2)(1-lu^2)(1-mu^2)}}$$

【0022】あるモンテカルロ法が良いか悪いか、つまり信頼できるかどうかは、その乱数発生方法が良いか悪いかに関わってくるのが知られている (D. E. Knuth, The Art of Computer Programming, 1981, second edition, Addison-Wesley)。このことは1947年のJ. von NeumannとS. M. Ulam によるモンテカルロ法の一般の定式化 (N. Metropolis, in From Cardinals to Chaos, edited by N. G. Cooper, p. 125, Cambridge University Press, 1989) から始まるモンテカルロ法の歴史が、J. von Neumannの平均採中法 (1940年台)、D. H. Lehmerの乗積合同法 (1951年) 等の如何に性質の良い一様乱数を作るかの歴史であったことからわかる (津田孝夫、モンテカルロ法とシミュレーション、培風館、三

1 (3) ... A₄ (3), B₂ (3) ... B₂ (3), l, m

は、【数6】で示され、【数5】におけるK (l, m)

は、【数7】で示される。

【0020】

【数6】

訂版、1995)。

【0023】このようにモンテカルロ法と乱数発生方法とは密接な関係を持っている。上述したようにモンテカルロ法は、乱数を発生させる決定論的方程式 (式1) のエルゴート性をうまく利用したものである。ところで、本発明者の研究分野であるカオス力学系においても、

(式1)と同様に決定論的な性質を有し、不変測度の存在も確認されている。本発明は、この似通った性質を利用してモンテカルロ法のような統計的シミュレーション方法を提供しようとするものである。しかし、エルゴート性を示す【数2】において、不変測度 $\mu(dx)$ が陽に式で表現されないと【数2】の右辺の空間積分が何を計算しているのかが不明となり意味をなさない。今までのカオス力学系では、不変測度の存在が確認されているものの、特殊な場合を除いて、不変測度 $\mu(dx)$ を陽に式で表現することは困難であるとされていた。不変測度 $\mu(dx)$ を陽に式で表現することができるもの

(以下、解けるカオスという) としては、Ulam=Neumann 写像 (S. M. Ulam and J. von Neumann, Bull. Am. Math.

Soc. 53(1947)1120)、Chebyshev 写像(R.L. Adler and T.J. Rivlin, Proc. Am. Math. Soc. 15(1964)794.)、桂＝福田写像(S. Katsura and W. Fukuda, Physica A 130(1985)597.) が知られていたが、本発明者は、この定説に屈することなく鋭意研究に励んだ結果、これらの一連のエルゴート写像を含むカオス力学系(K. Umeno, Method of constructing exactly solvable chaos, to appear in Phys. Rev. E (1997) Vol. 55, No. 5 (May 1))のクラスまで拡張し、カオスの理想モデル $F(x)$ としてこれらを楕円関数の加法定理を表す有理式として最大限一般化することができ、物理量の期待値等を統計的に計算する統計的シミュレーション方法として優れていることを確認した。

【0024】すなわち、[数4]で表される本発明の乱数発生方法は、その力学系自身が2つの実数パラメータ (l, m) を持つことから連続無限個の種類ある有理写像で表され、またそのパラメータ (l, m) に応じて非一様な密度関数とそのパラメータの代数関数として陽に決まるといふ著しい特徴を持っている。更にこの有理写像がロジスティック写像 $F(x) = 4x(1-x)$ に代表されるように非線形性をもつため、一般に、この写像から生成された乱数列は非周期性(カオス)になり、非常に長い周期を持つことになる。従来のモンテカルロ法では、1ステップ毎に乱数を発生させていたため計算速度は遅くなるが、任意の長い乱数列を生成することができた。これは、モンテカルロ法が集団平均を長時間平均として計算していることに起因する。したがって、本発明においても、本発明の方法により得られる乱数列の周期が長いほど計算精度を向上させることができる。上述したように、本発明により生成された乱数列は非周期性(カオス)で非常に長い周期を持っているため、この点においても本発明は統計的シミュレーション方法に適した特徴を持っている。

【0025】本発明の方法を従来の一様乱数を基礎としたモンテカルロ法と比較するため、多重積分の計算をベンチマークテストとして実行した。その結果は、例外的な場合を除いて、一様乱数を使う従来のモンテカルロ法よりも非一様乱数を使う本発明の方法の方が、平均二乗誤差がより小さい点、つまり計算の収束が速くなる点において優れていることが判明した。その原因はまだ現時点では完全に理解されていないが、本発明の方法は、 (l, m) で特徴付けられる無限種類の系統立った乱数発生方法を基礎としている点からも従来の方法と比較して際だった優位性を持つと考えられる。

【0026】更に、本発明の乱数発生方法は1つの非線形有理式のみで記述可能なことから、計算機に実装する際、既存のソフトウェア(例、Fortran 言語)で記述する場合でも、その専用ハードウェアを作ることにより実現する場合でも、共に簡単であり、1ステップ当たりの計算時間を短くできる特徴を持つ。また、従来のモンテ

カルロ法と同様、自然に計算の並列化を行うことができ、特に多重積分の計算では、他の方法では類を見ない威力を発揮することが分かった。(例えば、下記の[実施例2]を参照)

【0027】下記の[実施例3]により、本発明の方法で使う非一様乱数列を基礎として一様乱数列に変換することも可能である。すなわち、本発明の方法を従来のモンテカルロ法にそのまま適用することができる。解けるカオスの中には、多段線形写像(例：テント写像)のように一様乱数列を生成するものもあるが、これらは一般に短い周期しか持たず、集団平均を長時間平均として計算するモンテカルロ法に適していない。一方、本発明の一様乱数発生方法では、写像 $F(l, m)$ の非線形性からいくらかでも非一様乱数列の周期を長くすることができ、長い周期の一様乱数列を生成することができる。したがって、本発明の方法をモンテカルロ法として使う有効性がある。

【0028】この結果、本発明の応用分野は、少なくとも従来のモンテカルロ法のそれと同程度に多岐に渡る。その広い応用例の一例として、電子回路の最悪の場合を想定する設計法(worst case design)での許容限界を知る上でのモンテカルロシミュレーションが挙げられる(C.W. Kemp, IEEE Transaction on Communication Technology, Com-14(1966), 329)。

【0029】その基本となる考え方は、回路パラメータが公称値の周りで揺らぎを持つ確率変数として捉え、多数のサンプル回路について動作シミュレーションをし、寿命試験を行うというものである。その考え方は、デバイスモデリングにも適用でき、従来モンテカルロ法が適用されてきたTED, MOSFET, MESFET, バイポーラトランジスタ、ヘテロ構造素子、ショットキーダイオード、光検出器に限らず最強のヘテロ接合素子等のシミュレーションにも有効である。

【0030】また、特に本発明の基礎として使われる非一様な分布を持つ乱数の有効性が顕著にでる多重積分計算においては、数値解析一般の基礎となり、その応用例として多次元多峰性関数の最大値、最小値を求める計算方法が挙げられる。この場合、モンテカルロ法以外の有効な計算方法が無く、この最適化問題はオペレーションリサーチ(OR)の分野の線形計画法の拡張と考えられる非線形計画法と等価であり、スケジューリング問題に応用することもできる。

【0031】

【実施例】

【実施例1】図1のA～Dは、解けるカオス、すなわちカオスの理想モデル $F(x)$ の例であり、その不変測度、すなわち非一様な密度関数 $\rho(x)$ は、図2のようになる。また、そのような解けるカオスを使った本発明の方法と、従来のモンテカルロ法とを比較したものが図3である。

【0032】図3から、モンテカルロ法より、収束が早く、本発明の方法の方が優れていることがわかる。これは、1ステップ毎に乱数を発生させなければならないモンテカルロ法と、長い周期の乱数列を生成する本発明の方法との乱数発生方法の違いによる計算速度の向上と、解けるカオスを使用したことによる計算誤差の減少が、主な理由と考えられる。

【0033】〔実施例2〕「任意の多重積分 $f(X_1, X_2, X_3, \dots, X_n)$ を計算する方法」(ただし、積分の範囲は各 i に対し、 $0 \leq X_i \leq 1$ とする。)

ステップ1 $X_1, X_2, X_3, \dots, X_n$ に適当な初期値を与える。

ステップ2 各 X_i をカオス力学系 $X_i := F(1, m)(X_i)$ に従って更新する。

ステップ3 ステップ2を N 回繰り返す。

ステップ4 $f(X_1, X_2, \dots, X_n)G(X_1)G(X_2)\dots G(X_n)$ と各 $G(X_i)$ の時間平均 $\langle f(X_1, X_2, \dots, X_n)G(X_1)G(X_2)\dots G(X_n) \rangle$, $\langle G(X_i) \rangle$ を計算する。ただし、 $G(X) \cdot G(X) = X(1-X)(1-mX)$ で、 $m \leq 1 < 1$ という条件が付く。

ステップ5 カオス力学系 $Y = F(1, m)(X)$ の持つエルゴード性より、 $I(f) = \langle f(X_1, X_2, \dots, X_n)G(X_1)G(X_2)\dots G(X_n) \rangle / \langle G(X_1) \rangle \dots \langle G(X_n) \rangle$ が求める多重積分の近似解である。

【0034】注：有理式 $F(1, m)(X)$ の具体的な形は本発明者による発表文献“Method of constructing exactly solvable chaos” to appear in Phys. Rev. E (1997)中の式(5) (一般化ウラム=ノイマン写像)又は式(25) (一般化Cubic 写像)を参照)

【0035】〔実施例3〕

「非一様な分布から一様分布に戻すアルゴリズム」

ステップ1 各 X_i をカオス力学系 $X_i := F(1, m)(X_i)$ に従って更新する。

ステップ2 $Y_i := \text{Sqrt}(X_i)$ つまり $Y_i \times Y_i = X_i$ となる。

ステップ3 $Z_i = s^{-1}(\text{Sqrt}(Y_i))/K$ は一様分布を持つ乱

数となる。ただし、 $s^{-1}(X)$, K は、それぞれ上記文献中の式(9)、(7)で定義される。

【0036】注：実際にこの方法で一様乱数を作る時には、 $s^{-1}(X)$, K に対する数値を参照表形式(ルックアップ・テーブル形式)で記憶させると効率が良い。

【0037】なお、本発明は上述した実施例に限定されるものではなく、本発明の要旨を逸脱しない範囲で種々変更できることは勿論である。また、本発明の方法を実施するプログラムを記憶媒体(CD-ROM, フロッピーディスク等)に格納し、コンピュータ、各種の自動装置により統計的シミュレーションを実施することを包含するものである。

【0038】

【発明の効果】上述したように、本発明の方法によれば、カオスの理想モデル $F(x)$ を用いて長い周期を持った乱数列を発生させるので、1ステップ毎に乱数を発生させなければならないモンテカルロ法よりも計算速度自体が速くなる。また、本発明の方法では、解けるカオス、すなわち非一様な密度関数 $\rho(x)$ を持つ乱数発生法を使用した結果、従来のモンテカルロ法に比べて計算誤差が小さくなることがわかった。したがって、この計算速度の向上と計算誤差の減少により、計算の収束を速くすることができる。更に、その他の手法は、モンテカルロ法と同様に行うので、モンテカルロ法と同様の統計的シミュレーションを行うことができる。

【0039】従って、計算結果の収束時間を短縮し、従来取り扱えなかった課題の取扱いを可能にすることができる。

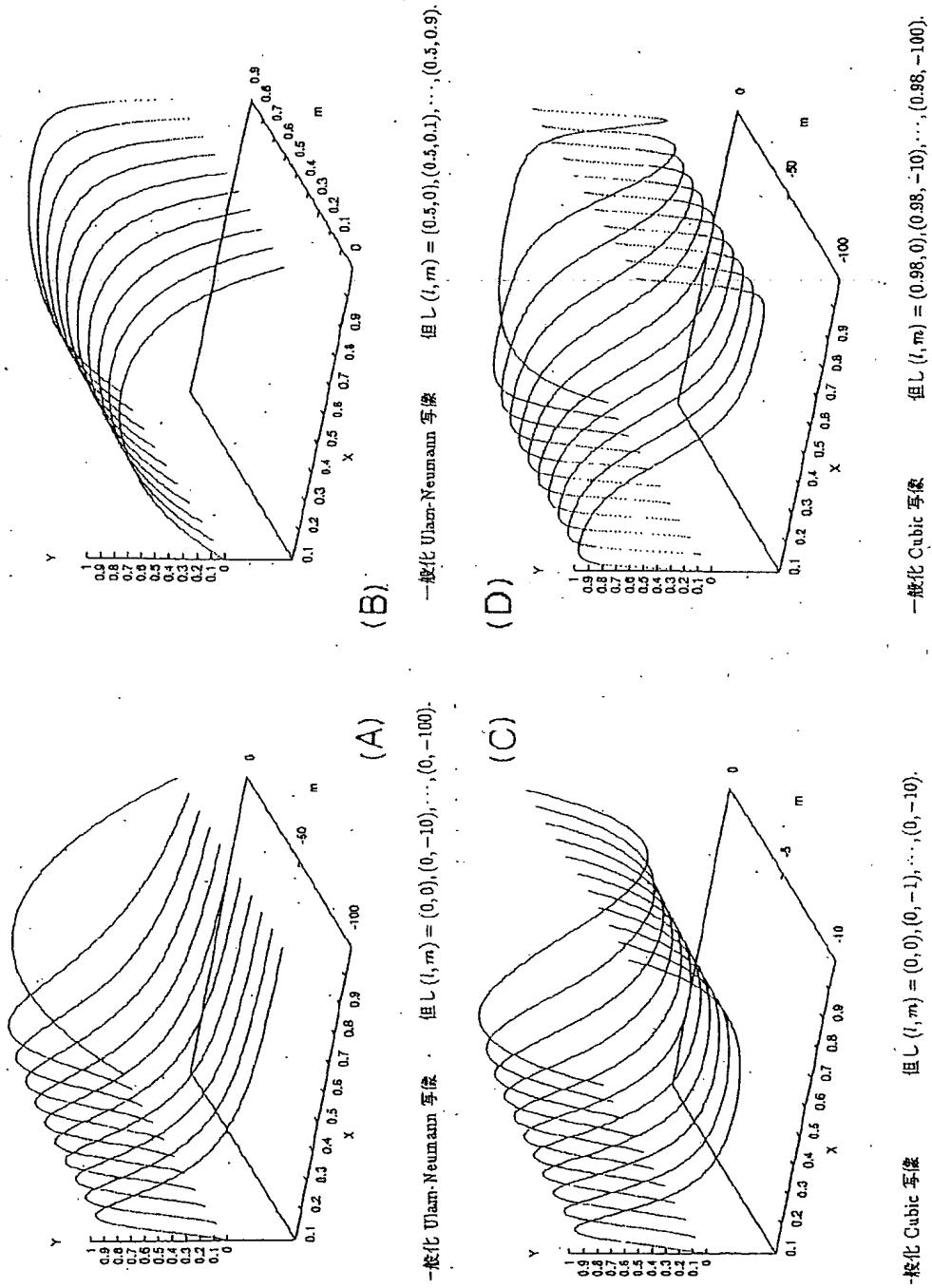
【図面の簡単な説明】

【図1】カオスの理想モデル $F(x)$ の例である。

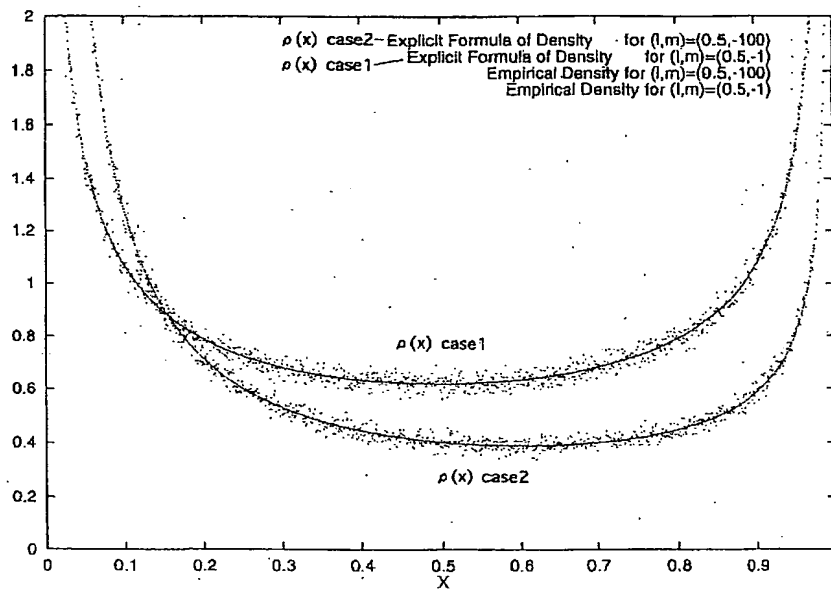
【図2】非一様な密度関数 $\rho(x)$ の例である。

【図3】本発明の方法と一様乱数を使ったモンテカルロ法との比較図である。

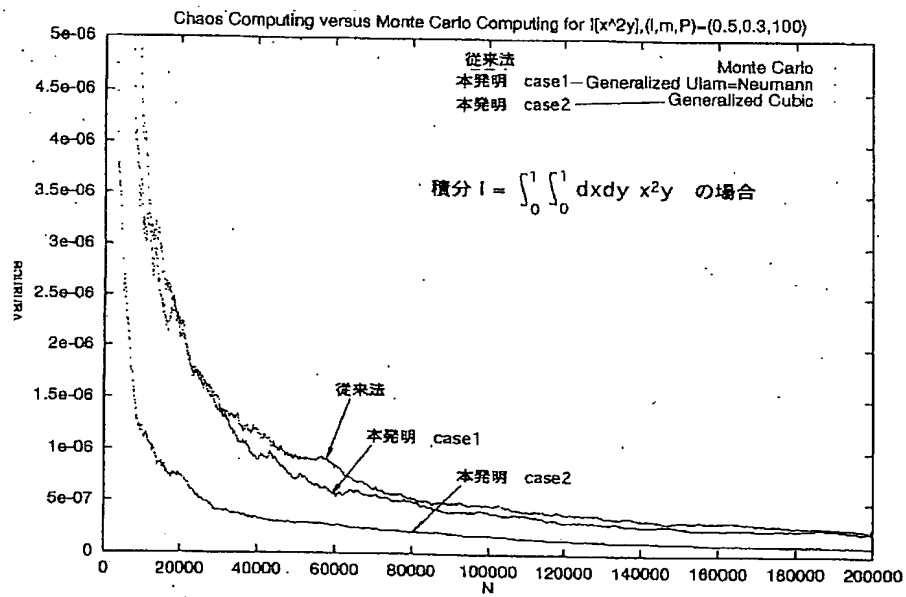
【図1】



【図2】



【図3】



(19) 日本国特許庁 (J P)

(12) 公開特許公報 (A)

(11) 特許出願公開番号

特開平10-283344

(43) 公開日 平成10年(1998)10月23日

(51) Int.Cl.⁶

G 0 6 F 17/18

17/00

識別記号

F I

G 0 6 F 15/36

15/20

Z

D

審査請求 未請求 請求項の数5 O L (全 8 頁)

(21) 出願番号 特願平9-82723

(22) 出願日 平成9年(1997)4月1日

特許法第30条第1項適用申請有り 1996年12月発行の R
I K E N Review No. 14に文書をもって発表

(71) 出願人 000006792

理化学研究所

埼玉県和光市広沢2番1号

(71) 出願人 597044841

梅野 健

東京都板橋区成増1丁目16番地18号 R S

Kビル206号室

(72) 発明者 梅野 健

埼玉県和光市広沢2番1号 理化学研究所

内

(74) 代理人 弁理士 堀田 実 (外1名)

(54) 【発明の名称】 統計的シミュレーション方法及びこのプログラムを記録した記憶媒体

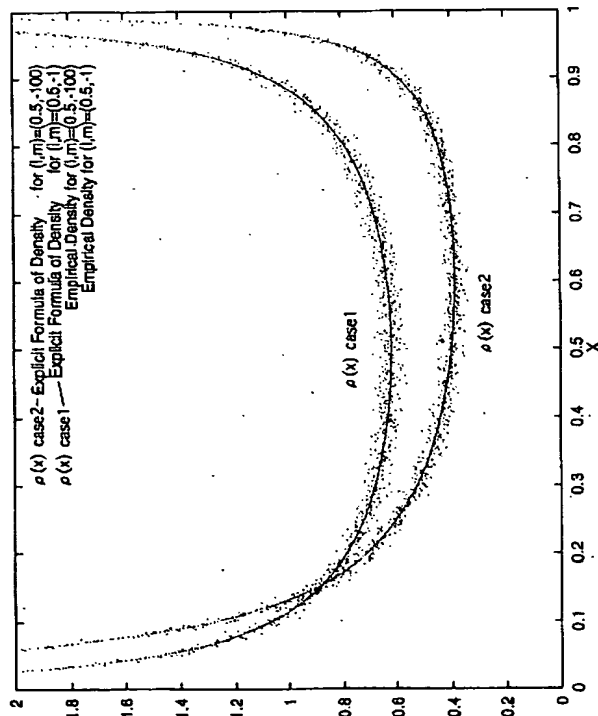
(57) 【要約】

【課題】 モンテカルロ法と同様の統計的シミュレーションを行うことができ、かつ、モンテカルロ法よりも計算速度と計算誤差を高めることができ、これにより、計算結果の収束時間を短縮し、従来取り扱えなかった課題の取扱いを可能にすることができる統計的シミュレーション方法及びこのプログラムを記録した記憶媒体を提供する。

【解決手段】 非一様な密度関数 $\rho(x)$ をもつ乱数を、カオスの理想モデル $x_{n+1} = F(x_n)$ で発生させて、モンテカルロ法を適用して確率現象をシミュレーションする。カオスの理想モデル $F(x)$ は、楕円関数の加法定理から導かれる写像のクラスであり、非一様な密度関数 $\rho(x)$ は、変数 x の代数関数で表される。カオスの理想モデル $F(x)$ の具体例として、一般化ウラム＝ノイマン写像、一般化 Cubic 写像があり、それらの非一様な密度関数 $\rho(x)$ は [数1] で表される。

【数1】

$$\rho(x) = \frac{1}{2\pi(1-m)\sqrt{x(1-x)(1-bx)(1-mx)}}$$



【特許請求の範囲】

【請求項1】 物理量の期待値や多体問題を計算するにあたり、乱数を発生させて確率現象を構成し、前記計算を統計的に行う統計的シミュレーション方法において、非一様な密度関数 $\rho(x)$ をもつ乱数を、カオスを生成する力学系 $x_{n+1} = F(x_n)$ で発生させる、ことを特徴とする統計的シミュレーション方法。

【請求項2】 前記非一様な密度関数 $\rho(x)$ は、 $x=0$ 及び 1 で無限大となり、 $0 < x < 1$ の範囲で下に凸な連続曲線である、ことを特徴とする請求項1に記載の統計的シミュレーション方法。

【請求項3】 前記カオスのモデル $F(x)$ は、一般化ウラム＝ノイマン写像又は一般化Cubic写像で代表される、楕円関数の加法定理より導かれる有理関数によって表され、非一様な密度関数 $\rho(x)$ は、一般化ウラム＝ノイマン写像、一般化Cubic写像の場合【数1】で表される

【数1】

$$\mu(dx) = \rho(x)dx$$

$$\rho(x) = \frac{1}{2K(l, m) \sqrt{x(1-x)(1-lx)(1-mx)}}$$

ことを特徴とする、請求項1に記載の統計的シミュレーション方法。

【請求項4】 前記カオスモデル $F(x)$ により発生される非一様乱数列を、長い周期を持った一様乱数列に変換して前記計算を行う、ことを特徴とする請求項1に記載の統計的シミュレーション方法。

【請求項5】 物理量の期待値や多体問題を計算するにあたり、非一様な密度関数 $\rho(x)$ をもつ乱数を、カオスモデル $F(x)$ で発生させて確率現象を構成し、前記計算を統計的に行う統計的シミュレーションプログラムを記憶した記憶媒体。

【発明の詳細な説明】

【0001】

【発明の属する技術分野】本発明は、物理量の期待値等を統計的に計算する統計的シミュレーション方法及びこのプログラムを記録した記憶媒体に関する。

【0002】

【従来の技術】物理量の期待値等を統計的に計算する統計的シミュレーション方法として、よく知られている方法にモンテカルロ法がある。このモンテカルロ法は、例えばデバイスモデリングの分野で従来から広く用いられており、この方法を用いて開発された素子として、TE D、MOSFET、MESFET、バイポーラ・トランジスタ、ヘテロ構造素子、ショットキー・ダイオード、光検出器、等が知られている。また、pn接合、ヘテロ接合素子等のシミュレーションや、不確定なものが沢山集まったその他の多体問題、例えば、オペレーションリサーチや社会学の分野でもモンテカルロ法が用いられて

いる。

【0003】上述したモンテカルロ法は、乱数を発生させて確率現象を構成し、その確率現象を計算機を用いて計算又はシミュレーションする方法である。このモンテカルロ法を多数粒子シミュレーションに応用した場合について考えると、この方法は、ある粒子（電子や分子）の運動を十分長い時間に渡って追跡すれば、全電子系や全ガス系の挙動に関する情報が得られることを前提としている。そして、ある粒子（キャリア）の自由走行過程において、その自由走行を決定する条件に固有の確率分布関数を使用して乱数を連続的に発生させ、そのキャリアの時間経過を計測することにより粒子の動きをシミュレーションしている。

【0004】これを一般化すると、モンテカルロ法は、「集団平均は長時間平均に等しい」というエルゴート仮説を基礎としたものである。すなわち、乱数を発生させる決定論的方程式 $x_{n+1} = F(x_n)$. . (式1) のエルゴート性をうまく利用したものである。ここで(式1)がエルゴート性を持つとは、(式1)に従う物理量 x_n ($\in M$) に対し、不変測度 $\mu(dx)$ が存在し、【数2】が成立することをいう。【数2】は、相空間M上の不変測度 $\mu(dx)$ に関する関数 $Q(x)$ の積分が、 $Q(x_i)$ の時間積分に等しいことを意味し、上述した前提を数式で表したものである。【数2】によれば、モンテカルロ法は、【数2】の右辺の相空間M上の空間積分を、(式1)の不変測度 $\mu(dx)$ を構成する確率現象としてとらえ、計算の易しい時間積分に置換して計算するものである。

【0005】

【数2】

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N Q(x_i) = \int_M Q(x) \mu(dx)$$

【0006】

【発明が解決しようとする課題】上述したように、モンテカルロ法は、計算機を用いて物理量の期待値等を統計的にシミュレーションする方法であり、広い分野で利用されてきたが、モンテカルロ法を適用するには、大型の計算機が自由に使用できる環境が必要であり、また現在の計算機の能力では取り扱えない場合もある。すなわち、従来のモンテカルロ法では、一様な不変測度 $\mu(dx)$ をもつ乱数を1ステップ毎に発生させなければならず、その一様乱数は、「有限の周期を持つ擬似乱数」であるため計算速度や計算誤差をある程度以上には高めることができない問題点があった。このため、計算結果の収束までの時間が短縮できず、大型の計算機を長時間使用しても、取り扱えない場合が多い問題点があった。

【0007】本発明は、かかる問題点を解決するために創案されたものである。すなわち、本発明の目的は、モンテカルロ法と同様の統計的シミュレーションを行うこ

とができ、かつ、モンテカルロ法よりも計算速度と計算誤差を高めることができ、これにより、計算結果の収束時間を短縮し、従来取り扱えなかった課題の取扱いを可能にすることができる統計的シミュレーション方法及びこのプログラムを記録した記憶媒体を提供することにある。

【0008】

【課題を解決するための手段】本発明によれば、物理量の期待値や多体問題を計算するにあたり、乱数を発生させて確率現象を構成し、前記計算を統計的に行う統計的シミュレーション方法において、非一様な密度関数 ρ

(x)をもつ乱数を、カオスを生成する力学系 $x_{n+1} = F(x_n)$ で発生させることを特徴とする統計的シミュレーション方法が提供される。

【0009】本発明の好ましい実施形態によれば、前記非一様な密度関数 $\rho(x)$ は、 $x=0$ 及び1で無限大となり、 $0 < x < 1$ の範囲で下に凸な連続曲線である。また、前記カオスの理想モデル $F(x)$ は、一般化ウラム＝ノイマン写像又は一般化Cubic写像で代表される、楕円関数の加法定理より導かれる有理関数によって表され、非一様な密度関数 $\rho(x)$ は、一般化ウラム＝ノイマン写像、一般化Cubic写像の場合【数3】で表される。

【0010】さらに、前記カオスの理想モデル $F(x)$ により発生される非一様な密度関数を持つ乱数列を、長い周期を持った一様乱数列に変換して通常のモンテカルロ計算を行うこともできる。

【0011】

【数3】

$$\mu(dx) = \rho(x)dx$$

$$\rho(x) = \frac{1}{2K(l, m) \sqrt{x(1-x)(1-lx)(1-mx)}}$$

【0012】上記本発明の方法によれば、密度関数 $\rho(x)$ を持つ乱数を、カオスの写像 $F(x)$ を用いて連続的に発生させるので（すなわち、カオスの性質からある点 x の軌道を考えれば、その軌道はランダムなものとなる）、決定論的方程式（式1）により1ステップ毎に乱数を発生させなければならないモンテカルロ法よりも計算速度自体が速くなる。また、本発明の方法では、カオスの理想モデル $F(x)$ を用いた結果、密度関数 ρ

(x)が非一様となり、一様な密度関数を持つ算術乱数を生成し確率現象をシミュレーションするモンテカルロ法と比べて、実際の適用の結果、後述するように計算誤差が小さくなり、収束が速くなることがわかった。その他の手法は、モンテカルロ法と同様に行うので、モンテカルロ法と同様の統計的シミュレーションを行うことができる。更に、カオスの理想モデル $F(x)$ により発生される非一様乱数列を一様乱数列に変換することにより、従来のモンテカルロ法と全く同様に適用することも

できる。

【0013】従って、計算結果の収束時間を短縮し、従来取り扱えなかった課題の取扱いを可能にすることができる。

【0014】更に、本発明によれば、物理量の期待値や多体問題を計算するにあたり、非一様な密度関数 ρ

(x)をもつ乱数を、カオスの理想モデル $F(x)$ で発生させて確率現象を構成し、前記計算を統計的に行う統計的シミュレーションプログラムを記憶した記憶媒体が提供される。かかる記憶媒体の利用により、本発明の適用を迅速に誤りなく実施することができる。

【0015】

【発明の実施の形態】以下、本発明の好ましい実施形態を図面を参照して説明する。なお、各図において共通する部分には同一の符号を付して重複した説明を省略する。まず、一様乱数を使うモンテカルロ法と比較して本発明を説明する。モンテカルロ法とは、計算機を用いて確率現象をシミュレーションする方法である。その意味では、本発明の方法もモンテカルロ法の範疇に入るものである。ただし、従来のモンテカルロ法は全て最初に一様な密度関数を持つ算術乱数を生成して確率現象をシミュレーションするのに対し、本発明の方法は最初に非一様な密度関数 $\rho(x)$ をもつ乱数を自然界に普遍的に見られるカオスの理想モデル $F(x)$ で発生している点が大きく異なっている。

【0016】ここで、カオスの理想モデル $F(x)$ の例は、【数4】で表され、その例の場合の非一様な密度関数 $\rho(x)$ は、【数5】で表される。ここで、【数4】のcase1は、一般化ウラム＝ノイマン写像（図1の(A)(B)）であり、case2は、一般化Cubic写像（図1の(C)(D)）であり、これらの写像は全て楕円関数の加法定理から導かれる有理写像であることを特徴とする。

【0017】

【数4】

case1:

$$F(x) = \frac{4x(1-x)(1-lx)(1-mx)}{1+Ax^2+Bx^3+Cx^4}$$

case2:

$$F(x) = \frac{x(-3+4x+\sum_{i=1}^4 A_i^{(3)} x^i)^2}{1+\sum_{i=2}^9 B_i^{(3)} x^i}$$

【0018】

【数5】

$$\mu(dx) = \rho(x)dx$$

$$\rho(x) = \frac{1}{2K(l, m) \sqrt{x(1-x)(1-lx)(1-mx)}}$$

【0019】なお、[数4]において、A, B, C, A

$$A = -2(l+m+lm)$$

$$B = 8lm$$

$$C = l^2 + m^2 - 2lm - 2l^2m - 2lm^2 + l^2m^2$$

$$-\infty < m \leq l < 1$$

$$A_1^{(3)} = 4(l+m),$$

$$A_2^{(3)} = -6(l+m+lm),$$

$$A_3^{(3)} = 12lm,$$

$$A_4^{(3)} = l^2 + m^2 - 2lm - 2l^2m - 2lm^2 + l^2m^2,$$

$$B_2^{(3)} = -12(l+m+lm),$$

$$B_3^{(3)} = 8(l+m+l^2+m^2+l^2m+lm^2+15lm),$$

$$B_4^{(3)} = 6(5l^2+5m^2-26lm-26l^2m-26lm^2+5l^2m^2),$$

$$B_5^{(3)} = 24(-2l^2-2m^2-2l^3-2m^3+4lm+7l^2m+7lm^2)$$

$$+24(4l^3m+4lm^3+7l^2m^2-2l^3m^2-2l^2m^3),$$

$$B_6^{(3)} = 4(4l^2+4m^2+4l^4+4m^4+17l^3+17m^3-8lm)$$

$$+4(-17l^2m-17lm^2-17l^3m-17lm^3-8l^4m-8lm^4)$$

$$+4(4l^2m^4+4l^4m^2-17l^3m^2-17l^2m^3+17l^3m^3-54l^2m^2),$$

$$B_7^{(3)} = 24(-l^3-m^3-l^4-m^4+l^2m+lm^2-l^3m-lm^3)$$

$$+24(l^4m+lm^4+4l^2m^2+4l^3m^2+4l^2m^3)$$

$$+24(l^4m^2+l^2m^4-l^3m^3-l^4m^3-l^3m^4),$$

$$B_8^{(3)} = 3(3l^4+3m^4+4l^3m+4lm^3+4l^4m+4lm^4-14l^2m^2)$$

$$+3(-4l^3m^2-4l^2m^3-4l^3m^3-14l^4m^2-14l^2m^4+4l^4m^3+4l^3m^4+3l^4m^4),$$

$$B_9^{(3)} = 8(-l^4m-lm^4+l^3m^2+l^2m^3+l^4m^2+l^2m^4-2l^3m^3+l^4m^3+l^3m^4-l^4m^4)$$

【0021】

【数7】

$$K(l, m) = \int_0^1 \frac{du}{\sqrt{(1-u^2)(1-lu^2)(1-mu^2)}}$$

【0022】あるモンテカルロ法が良いか悪いか、つまり信頼できるかどうかは、その乱数発生方法が良いか悪いかに関わってくるということが知られている (D.E. Knuth, The Art of Computer Programming, 1981, second edition, Addison-Wesley)。このことは1947年のJ. von NeumannとS.M. Ulam によるモンテカルロ法の一般の定式化(N. Metropolis, in From Cardinals to Chaos, edited by N.G. Cooper, p.125, Cambridge University Press, 1989) から始まるモンテカルロ法の歴史が、J. von Neumannの平均採中法(1940年台)、D. H. Lehmerの乗積合同法(1951年)等の如何に性質の良い一様乱数を作るかの歴史であったことからわかる(津田孝夫、モンテカルロ法とシミュレーション、培風館、三

1 (3) ... A4 (3), B2 (3) ... B2 (3), l, m は、[数6] で示され、[数5] におけるK (l, m) は、[数7] で示される。

【0020】

【数6】

訂版、1995)。

【0023】このようにモンテカルロ法と乱数発生方法とは密接な関係を持っている。上述したようにモンテカルロ法は、乱数を発生させる決定論的方程式(式1)のエルゴート性をうまく利用したものである。ところで、本発明者の研究分野であるカオス力学系においても、

(式1)と同様に決定論的な性質を有し、不変測度の存在も確認されている。本発明は、この似通った性質を利用してモンテカルロ法のような統計的シミュレーション方法を提供しようとするものである。しかし、エルゴート性を示す[数2]において、不変測度 $\mu(dx)$ が陽に式で表現されないと[数2]の右辺の空間積分が何を計算しているのかが不明となり意味をなさない。今までのカオス力学系では、不変測度の存在が確認されているものの、特殊な場合を除いて、不変測度 $\mu(dx)$ を陽に式で表現することは困難であるとされていた。不変測度 $\mu(dx)$ を陽に式で表現することができるもの

(以下、解けるカオスという)としては、Ulam=Neumann 写像(S.M. Ulam and J. von Neumann, Bull. Am. Math.

Soc. 53(1947)1120)、Chebyshev 写像(R. L. Adler and T. J. Rivlin, Proc. Am. Math. Soc. 15(1964)794.)、桂=福田写像(S. Katsura and W. Fukuda, Physica A 130(1985)597.) が知られていたが、本発明者は、この定説に屈することなく鋭意研究に励んだ結果、これらの一連のエルゴート写像を含むカオス力学系(K. Umeno, Method of constructing exactly solvable chaos, to appear in Phys. Rev. E (1997) Vol. 55, No. 5 (May 1))のクラスまで拡張し、カオスの理想モデル $F(x)$ としてこれらを楕円関数の加法定理を表す有理式として最大限一般化することができ、物理量の期待値等を統計的に計算する統計的シミュレーション方法として優れていることを確認した。

【0024】すなわち、[数4]で表される本発明の乱数発生方法は、その力学系自身が2つの実数パラメータ (l, m) を持つことから連続無限個の種類ある有理写像で表され、またそのパラメータ (l, m) に応じて非一様な密度関数とそのパラメータの代数関数として陽に決まるといふ著しい特徴を持っている。更にこの有理写像がロジスティック写像 $F(x) = 4x(1-x)$ に代表されるように非線形性をもつため、一般に、この写像から生成された乱数列は非周期性(カオス)になり、非常に長い周期を持つことになる。従来のモンテカルロ法では、1ステップ毎に乱数を発生させていたため計算速度は遅くなるが、任意の長い乱数列を生成することができるため所要の計算精度を得ることができた。これは、モンテカルロ法が集団平均を長時間平均として計算していることに起因する。したがって、本発明においても、本発明の方法により得られる乱数列の周期が長いほど計算精度を向上させることができる。上述したように、本発明により生成された乱数列は非周期性(カオス)で非常に長い周期を持っているため、この点においても本発明は統計的シミュレーション方法に適した特徴を持っている。

【0025】本発明の方法を従来の一様乱数を基礎としたモンテカルロ法と比較するため、多重積分の計算をベンチマークテストとして実行した。その結果は、例外的な場合を除いて、一様乱数を使う従来のモンテカルロ法よりも非一様乱数を使う本発明の方法の方が、平均二乗誤差がより小さい点、つまり計算の収束が速くなる点において優れていることが判明した。その原因はまだ現時点では完全に理解されていないが、本発明の方法は、 (l, m) で特徴付けられる無限種類の系統立った乱数発生方法を基礎としている点からも従来の方法と比較して際だった優位性を持つと考えられる。

【0026】更に、本発明の乱数発生方法は1つの非線形有理式のみで記述可能なことから、計算機に実装する際、既存のソフトウェア(例、Fortran 言語)で記述する場合でも、その専用ハードウェアを作ることにより実現する場合でも、共に簡単であり、1ステップ当たりの計算時間を短くできる特徴を持つ。また、従来のモンテ

カルロ法と同様、自然に計算の並列化を行うことができ、特に多重積分の計算では、他の方法では類を見ない威力を発揮することが分かった。(例えば、下記の[実施例2]を参照)

【0027】下記の[実施例3]により、本発明の方法で使う非一様乱数列を基礎として一様乱数列に変換することも可能である。すなわち、本発明の方法を従来のモンテカルロ法にそのまま適用することができる。解けるカオスの中には、多段線形写像(例：テント写像)のように一様乱数列を生成するものもあるが、これらは一般に短い周期しか持たず、集団平均を長時間平均として計算するモンテカルロ法に適していない。一方、本発明の一様乱数発生方法では、写像 $F(l, m)$ の非線形性からいくらでも非一様乱数列の周期を長くすることができ、長い周期の一様乱数列を生成することができる。したがって、本発明の方法をモンテカルロ法として使う有効性がある。

【0028】この結果、本発明の応用分野は、少なくとも従来のモンテカルロ法のそれと同程度に多岐に渡る。その広い応用例の一例として、電子回路の最悪の場合を想定する設計法(worst case design)での許容限界を知る上でのモンテカルロシミュレーションが挙げられる(C. W. Kemp, IEEE Transaction on Communication Technology, Com-14(1966), 329)。

【0029】その基本となる考え方は、回路パラメータが公称値の周りで揺らぎを持つ確率変数として捉え、多数のサンプル回路について動作シミュレーションをし、寿命試験を行うというものである。その考え方は、デバイスモデリングにも適用でき、従来モンテカルロ法が適用されてきたTED, MOSFET, MESFET, バイポーラトランジスタ、ヘテロ構造素子、ショットキーダイオード、光検出器に限らず最強のヘテロ接合素子等のシミュレーションにも有効である。

【0030】また、特に本発明の基礎として使われる非一様な分布を持つ乱数の有効性が顕著にでる多重積分計算においては、数値解析一般の基礎となり、その応用例として多次元多峰性関数の最大値、最小値を求める計算方法が挙げられる。この場合、モンテカルロ法以外の有効な計算方法が無く、この最適化問題はオペレーションリサーチ(OR)の分野の線形計画法の拡張と考えられる非線形計画法と等価であり、スケジューリング問題に応用することもできる。

【0031】

【実施例】

【実施例1】図1のA～Dは、解けるカオス、すなわちカオスの理想モデル $F(x)$ の例であり、その不変測度、すなわち非一様な密度関数 $\rho(x)$ は、図2のようになる。また、そのような解けるカオスを使った本発明の方法と、従来のモンテカルロ法とを比較したものが図3である。

【0032】図3から、モンテカルロ法より、収束が早く、本発明の方法の方が優れていることがわかる。これは、1ステップ毎に乱数を発生させなければならないモンテカルロ法と、長い周期の乱数列を生成する本発明の方法との乱数発生方法の違いによる計算速度の向上と、解けるカオスを使用したことによる計算誤差の減少が、主な理由と考えられる。

【0033】【実施例2】「任意の多重積分 $f(X_1, X_2, X_3, \dots, X_n)$ を計算する方法」(ただし、積分の範囲は各 i に対し、 $0 \leq X_i \leq 1$ とする。)

ステップ1 $X_1, X_2, X_3, \dots, X_n$ に適当な初期値を与える。

ステップ2 各 X_i をカオス力学系 $X_i := F(l, m)(X_i)$ に従って更新する。

ステップ3 ステップ2を N 回繰り返す。

ステップ4 $f(X_1, X_2, \dots, X_n)G(X_1)G(X_2) \dots G(X_n)$ と各 $G(X_i)$ の時間平均 $\langle f(X_1, X_2, \dots, X_n)G(X_1)G(X_2) \dots G(X_n) \rangle$ 、 $\langle G(X_i) \rangle$ を計算する。ただし、 $G(X) \cdot G(X) = X(1-X)(1-lX)(1-mX)$ で、 $m \leq l < 1$ という条件が付く。

ステップ5 カオス力学系 $Y = F(l, m)(X)$ の持つエルゴート性より、 $I(f) = \langle f(X_1, X_2, \dots, X_n)G(X_1)G(X_2) \dots G(X_n) \rangle / \langle G(X_1) \rangle \dots \langle G(X_n) \rangle$ が求める多重積分の近似解である。

【0034】注：有理式 $F(l, m)(X)$ の具体的な形は本発明者による発表文献“Method of constructing exactly solvable chaos” to appear in Phys. Rev. E (1997)中の式(5) (一般化ウラム=ノイマン写像)又は式(25) (一般化Cubic 写像)を参照

【0035】【実施例3】

「非一様な分布から一様分布に戻すアルゴリズム」

ステップ1 各 X_i をカオス力学系 $X_i := F(l, m)(X_i)$ に従って更新する。

ステップ2 $Y_i := \text{Sqrt}(X_i)$ つまり $Y_i \times Y_i = X_i$ となる。

ステップ3 $Z_i = s^{-1}(\text{Sqrt}(Y_i))/K$ は一様分布を持つ乱

数となる。ただし、 $s^{-1}(X)$ 、 K は、それぞれ上記文献中の式(9)、(7)で定義される。

【0036】注：実際にこの方法で一様乱数を作る時には、 $s^{-1}(X)$ 、 K に対する数値を参照表形式(ルックアップ・テーブル形式)で記憶させると効率が良い。

【0037】なお、本発明は上述した実施例に限定されるものではなく、本発明の要旨を逸脱しない範囲で種々変更できることは勿論である。また、本発明の方法を実施するプログラムを記憶媒体(CD-ROM, フロッピーディスク等)に格納し、コンピュータ、各種の自動装置により統計的シミュレーションを実施することを包含するものである。

【0038】

【発明の効果】上述したように、本発明の方法によれば、カオスの理想モデル $F(x)$ を用いて長い周期を持った乱数列を発生させるので、1ステップ毎に乱数を発生させなければならないモンテカルロ法よりも計算速度自体が速くなる。また、本発明の方法では、解けるカオス、すなわち非一様な密度関数 $\rho(x)$ を持つ乱数発生法を使用した結果、従来のモンテカルロ法に比べて計算誤差が小さくなることがわかった。したがって、この計算速度の向上と計算誤差の減少により、計算の収束を速くすることができる。更に、その他の手法は、モンテカルロ法と同様に行うので、モンテカルロ法と同様の統計的シミュレーションを行うことができる。

【0039】従って、計算結果の収束時間を短縮し、従来取り扱えなかった課題の取扱いを可能にすることができる。

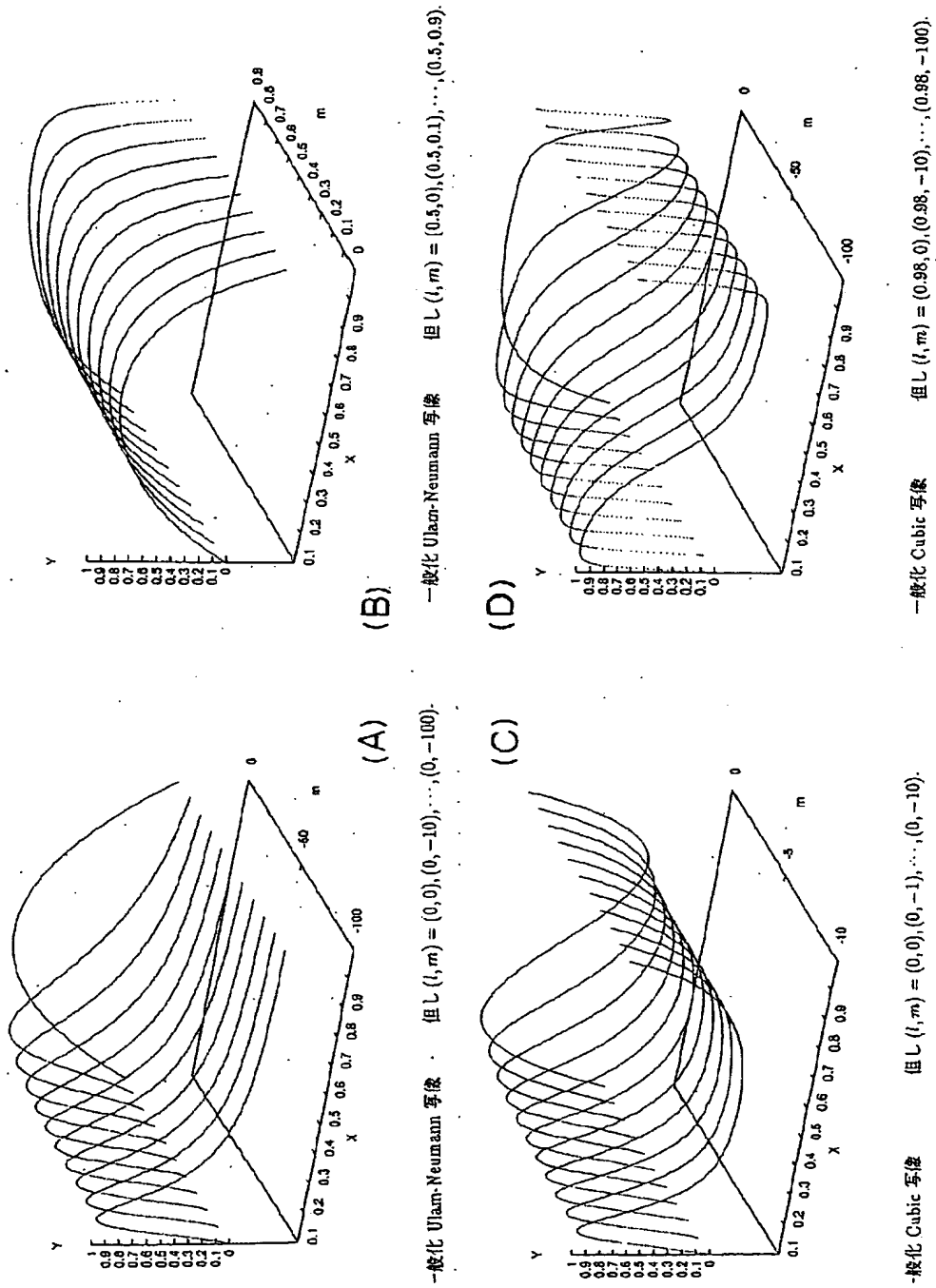
【図面の簡単な説明】

【図1】カオスの理想モデル $F(x)$ の例である。

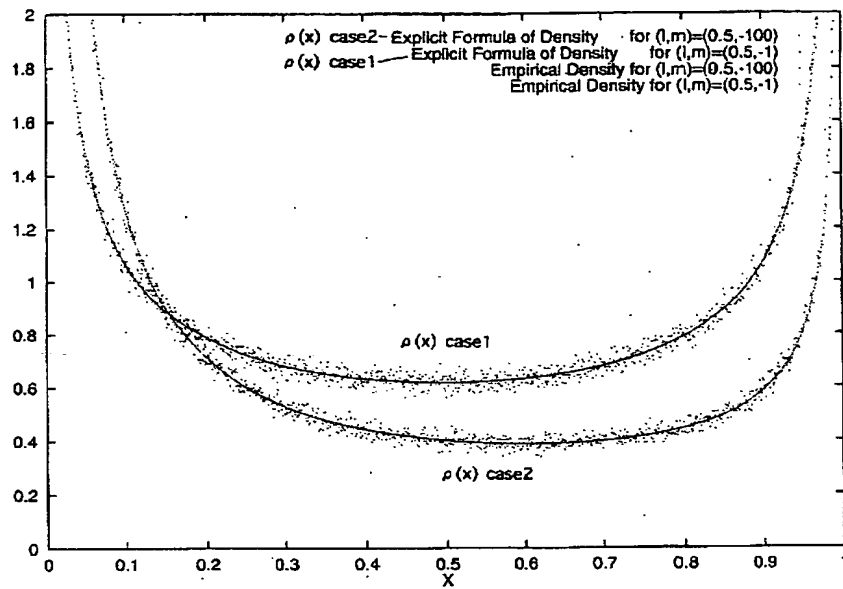
【図2】非一様な密度関数 $\rho(x)$ の例である。

【図3】本発明の方法と一様乱数を使ったモンテカルロ法との比較図である。

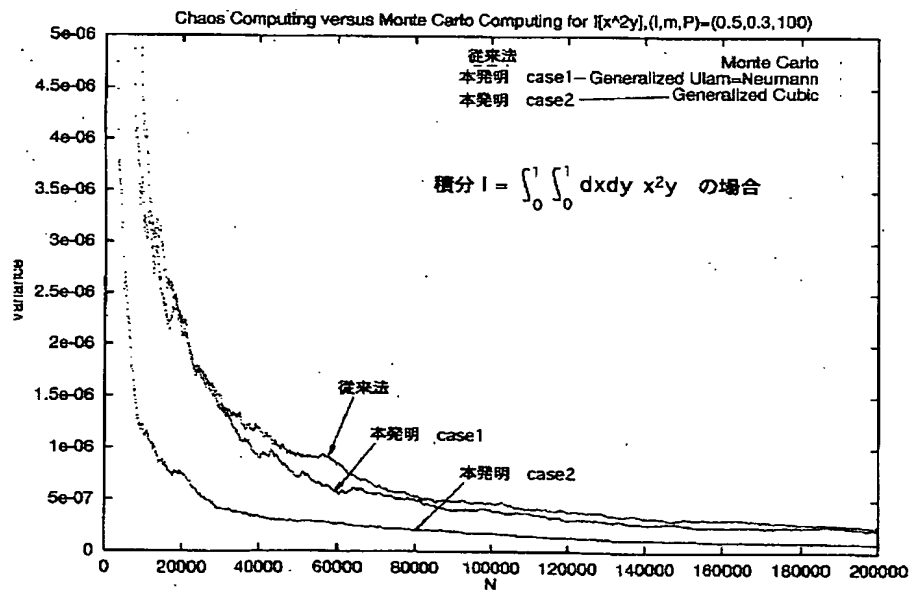
【図1】



【図2】



【図3】





PATENT ABSTRACTS OF JAPAN

(11) Publication number: **10283344 A**(43) Date of publication of application: **23 . 10 . 98**

(51) Int. Cl.

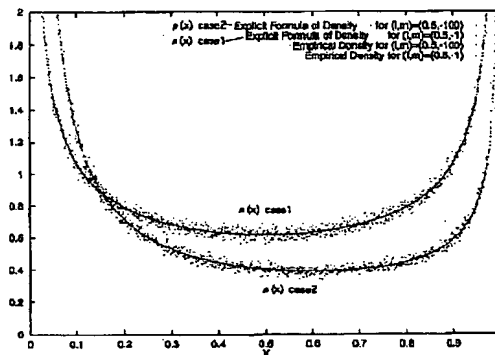
G06F 17/18
G06F 17/00(21) Application number: **09082723**(22) Date of filing: **01 . 04 . 97**(71) Applicant: **RIKAGAKU KENKYUSHO UMENO**
TAKESHI(72) Inventor: **UMENO TAKESHI**(54) **STATISTICAL SIMULATION METHOD AND
STORAGE MEDIUM RECORDED WITH THE
PROGRAM**

COPYRIGHT: (C)1998,JPO

(57) Abstract:

PROBLEM TO BE SOLVED: To shorten the converging time of calculated results, and to handle a project which can not be handled in a conventional way by operating statistical simulation similar to a Monte Carlo method, and increasing a calculating speed and a calculation error rather than the Monte Carlo method.

SOLUTION: A random number having a nonuniform density function $\gamma_0(x)$ is generated with a chaos ideal model $x_{n+1}=F(x_n)$, and the simulation of a probability phenomenon is operated by applying a Monte Carlo method. The chaos ideal model $F(x)$ is the class of mapping introduced from the addition theorem of an elliptic function, and the nonuniform density function $\rho(x)$ is expressed with the central function of a variable (x) . A generalized urnium = Neumann mapping and generalized Cubic mapping is obtained as the definite example of the chaos ideal model $F(x)$, and the uniform density function (x) is expressed with an expression ($\mu(dx)$ indicates fixed measure in the expression).



$$\mu(dx) = \rho(x)dx$$

$$\rho(x) = \frac{1}{2K(l, m) \sqrt{x(1-x)(1-lx)(1-mx)}}$$